Index

Pagina

Commentationes, Relationes et Annotationes

AHLRICHS, R., and W. KUTZELNIGG: *Ab initio* Calculations on Small Hydrides Including Electron Correlation. I. The BeH_2 Molecule in Its Ground State 377
ALLINGER, N. L., see STUART, T. W. 247
AŽMAN, A., see OCVIRK, A., and D. HADŽI 187

BELL, J. J., see FLURRY JR., R. L. 1
BERTHIER, G., voir ELLINGER, Y., A. RASSAT et R. SUBRA 289
BERTHOD, H., see PULLMAN, B., and J. CAILLET 43
— see PULLMAN, A. 461
BLYHOLDER, G., and C. A. COULSON: Basis of Extended Hückel Formalism 316
BONAČIĆ, V., and M. RANDIĆ: Ligand Field Splitting for a Diffuse Charge Model . . . 337
BROWN, R. D., B. A. W. COLLER, and J. E. KENT: 1,2,5-, 1,3,4- and 1,2,4-Oxadiazoles. A Theoretical Study of Electric Dipole Moments 435

CADIOLI, B., U. PINCELLI, and G. DEL RE: Hybridization and Correlation in a Model Calculation of a Two-Electron Bond 393
CAILLET, J., see PULLMAN, B., and H. BERTHOD 43
CHAPMAN, J. A., and D. P. CHONG: Use of Orthogonalised Atomic Orbitals in π-Electron Systems 364
CHONG, D. P., see CHAPMAN, J. A. 364
CLARK, D. T.: A Self Consistent Field Molecular Orbital Treatment, Including Excited States of Cyclopropane, Ethylene Oxide and Ethylenimine 111
— The π-Inductive Effect of the Ammonio (NH_3^+) Group 352
COLLER, B. A. W., see BROWN, R. D., and J. E. KENT 435
COULSON, C. A.: Hyperconjugation and Induction in the Methyl Benzenes 285
— see BLYHOLDER, G. 316
CSIZMADIA, I. G., see ROBB, M. A. 269

DEL RE, G., see MCWEENY, R. 13
— see CADIOLI, B., and U. PINCELLI 393
DENIS, A., see PULLMAN, A., E. KOCHANSKI, and M. GILBERT 231
DYADYUSHA, G. G., see KRUGLYAK, Y. A. 23

EHRENSON, S.: Theory of Electronic Effects in the Formation of the Trimethylamine-Trimethylboron Addition Complex 193
— Environmental Effects in the MO Treatment of the Trimethylamine-Trimethylboron Addition Reaction 209
ELLINGER, Y., A. RASSAT, R. SUBRA et G. BERTHIER: Structure électronique et spectres de resonance paramagnétique électronique des radicaux vinyle et cyclopropyle . . . 289
EMPEDOCLES, PH.: Force Constants. II. Heteronuclear Molecules 331

FEINBERG, M. J., see HAAS, T. E. 189
FELDMAN, M., and S. WINSTEIN: Aromatic Hydrocarbon-Carbonium Ion Molecular Complexes 86
FELER, G.: Indices de Liaison et Isomérie de Valence 33
FISK, C., see THORHALLSON, J., and S. FRAGA 388
FLURRY, R. L. JR., and J. J. BELL: Some Comments on the Parameter Choices for S.C.M.O. Calculations on Five Membered Heteroatomic π-Electron Systems 1
FORD, B.: Semi-Empirical LCAO-SCF Molecular Orbital Calculations for Selected Homo-Substituted Benzenes 342
FORSHEY, D. R., see PUKANIC, G. W., BR. J. D. WEGENER, and J. B. GREENSHIELDS . . 240
FRAGA, S., see THORHALLSON, J., and C. FISK 388

Pagina

Giacometti, G., see Rossi, M., and P. L. Nordio 263
Gilbert, M., see Pullman, A., E. Kochanski, and A. Denis 231
Greenshields, J. B., see Pukanic, G. W., D. R. Forshey, and Br. J. D. Wegener . . 240
Guidotti, C., and O. Salvetti: Numerical Evaluation of Matrix Elements of the Electric Field and Electric Field Gradient Operators in a Slater Basis Set 181
— — Double Orbital Exponent SCF Functions for H_2O, NH_3, CH_4 454

Haas, T. E., and M. J. Feinberg: Models for the Theory of the Hydrogen Bond: Linear H_3^- 189
Hadži, D., see Ocvirk, A., and A. Ažman 187
Harris, G.: Spin-Mixed States of Ferric Ion in Complexes of Tetragonal Symmetry. I. Eigenfunctions and Eigenvalues of Different Spin States 119
— Spin-Mixing and the Different Spin States of Ferric Ion in Tetragonal Symmetry. II. Localized Properties: Zero Field Splittings, Effective Magnetic Moments, Magnetic Field Energies and Electric Field Gradients of Ferric Ion 155
Hartmann, H., und K. Helfrich: Quantenmechanische Zweizentren-Coulomb-Modelle für Acetylen, Äthylen und Äthan 406
Hedges, R. M., and L. F. Phillips: The Electronic Structure of Angular Polyphenes . . 73
Helfrich, K., s. Hartmann, H. 406
Hinchliffe, A., and N. Trinajstić: Calculation of Proton Coupling Constants for Dibenzothiophene Radical Anion 458

Jordan, F., and B. Pullman: Extended Hückel Calculations on the Conformation and Structure of Thymine Photodimers 423
Jordan, M. D. Jr., and F. L. Pilar: The Use of Hückel Theory Charge Densities and Localization Energies for the Prediction of Kinetic and Thermodynamic Factors Involved in an Assumed Model for the Hydrohalogenation of 1,3-Butadiene, Isoprene and Chloroprene 325

Kent, J. E., see Brown, R. D., and B. A. W. Coller 435
Kibler, M. R., voir Michel-Calendini, F. M. O. 367
Knöll, L.: Über die Berechnung der Elektronenenergie eines Moleküls aus dem Erwartungswert der kinetischen Energie 357
Kochanski, E., see Pullman, A., M. Gilbert, and A. Denis 231
Kruglyak, Y. A., and G. G. Dyadyusha: Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. I. General Consideration 23
Kutzelnigg, W., see Ahlrichs, R. 377
Kwiatkowski, J. S.: Electronic Structure and Spectra of Organic Molecules. Part IV. The Pariser-Parr-Pople Type Calculations for Purine and Some of Its 6-Substituted Derivatives 47
— Electronic Spectrum of 2,6-Di(Diethylamino)Purine 361

Leibovici, C.: Étude théorique de l'oxime de l'acroléine 311
Lin, S. H.: Spectral Band Shape of Absorption and Emission of Molecules in Dense Media 301

Mataga, N.: Possible "Ferromagnetic States" of Some Hypothetical Hydrocarbons . . 372
McWeeny, R., and G. Del Re: Criteria for Bond Orbitals and Optimum Hybrids . . . 13
Michel-Calendini, F. M. O., et M. R. Kibler: Fonctions autocohérentes et intégrales radiales pour les ions de la série du fer 367
Moffat, J. B.: Physical Nature of the Chemical Bond. I. Approach to a Quasi-Optimized LCGTO-MO-SCF Wave Function for the Helium Hydride Ion 447
Mohammad, M., and B. R. Sundheim: ^{14}N Hyperfine Structure of Triphenylaminium Radical Ions 222

Nishimoto, K.: The Variable Core Approach in the SCF MO Calculation of Heteroatomic Systems 65
Nordio, P. L., see Rossi, M., and G. Giacometti 263
Nowakowski, J.: Anisotropy of Diamagnetic Susceptibility of Alternant Hydrocarbons 79

Ocvirk, A., A. Ažman, and D. Hadži: Application of CNDO/II to Some Hydrogen-Bonded Systems 187

Pagina

PAUNCZ, R., see SILBERMAN, Z. . . . 254
PHILLIPS, L. F., see HEDGES, R. M. . . . 73
PILAR, F. L., see JORDAN, M. D. JR. . . . 325
PINCELLI, U., see CADIOLI, B., and G. DEL RE . . . 393
PUKANIC, G. W., D. R. FORSHEY, BR. J. D. WEGENER, and J. B. GREENSHIELDS: LCAO-MO-SCF-CI Semi-Empirical π-Electron Calculations on Heteroaromatic Systems. Part III. Azines . . . 240
PULLMAN, A., E. KOCHANSKI, M. GILBERT, and A. DENIS: All Valence-Electrons Calculations on Purines and Pyrimidines. II. An Iterative Extended Hückel Computation 231
— and H. BERTHOD: On the Electronic Structure of the Hydrogen-Bond: Formamide and its Dimers . . . 461
PULLMAN, B., H. BERTHOD, and J. CAILLET: On the Crystal Structure of Purine . . . 43
— see JORDAN, F. . . . 423

RANDIC, M., see BONAČIĆ, V. . . . 337
RASSAT, A., voir ELLINGER, Y., R. SUBRA et G. BERTHIER . . . 289
ROBB, M. A., and I. G. CSIZMADIA: Non-Empirical LCAO-MO-SCF-CI Calculations on Organic Molecules with Gaussian Type Functions. IV. Preliminary Investigations on Formamide . . . 269
ROSSI, M., P. L. NORDIO, and G. GIACOMETTI: Theory of Deuterium Effect on the ESR Spectra of Cyclic Polyene Radicals. A Semiempirical Approach . . . 263
RUCH, E., u. A. SCHÖNHOFER: Näherungsformeln für spiegelungsantimetrische Molekül-eigenschaften . . . 91

SALVETTI, O., see GUIDOTTI, C. . . . 181, 454
SCHÖNHOFER, A., s. RUCH, E. . . . 91
SILBERMAN, Z., and R. PAUNCZ: Application of the AMO Method to the Naphthalene Molecule . . . 254
SUBRA, R., voir ELLINGER, Y., A. RASSAT et G. BERTHIER . . . 289
SUNDHEIM, B. R., see MOHAMMAD, M. . . . 222
STUART, T. W., and N. L. ALLINGER: Further Studies on Configuration Interaction in the Molecular Orbital Theory of π-Systems . . . 247

THORHALLSSON, J., C. FISK, and S. FRAGA: Physical Properties of Many-Electron Atomic Systems Evaluated from Analytical Hartree-Fock Functions. VII. Electric Dipole Polarizabilities . . . 388
TRINAJSTIĆ, N., see HINCHLIFFE, A. . . . 458

WEGENER, BR. J. D., see PUKANIC, G. W., D. R. FORSHEY, and J. B. GREENSHIELDS . . 240
WINSTEIN, S., see FELDMAN, M. . . . 86

Errata

MALRIEU, J. P., P. CLAVERIE, and S. DINER: Use of Perturbation Methods for the Study of Configuration Interaction Effects. III. The Second Order Corrections to Transition Energies . . . 467
CLARK, D. T.: Self Consistent Field Molecular Orbital Treatment Including Excited States of Cyclopropane, Ethylene Oxide and Ethyleneimine . . . 467

Recensiones

LÖWDIN, P.-O.: Advances in Quantum Chemistry (Ref. K. JUG) . . . 287
DAUDEL, R.: Théorie quantique de la réactivité chimique (Ref. H. GEBELEIN) . . . 465
HAMEKA, H. F.: Introduction to Quantum Theory (Ref. K. HENSEN) . . . 465
JANSEN, L., and M. BOON: Theory of finite groups (Ref. E.-A. REINSCH) . . . 466
JØRGENSEN, C. K., J. B. NEILANDS, R. S. NYHOLM, D. REINEN, and R. J. P. WILLIAMS: Structure and Bonding, Volume 2 (Ref. B. PULLMAN) . . . 90

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 5 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 96.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 5 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 96.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue parait aux courts intervalles. dans la mesure des articles reçus. En générale un volume se compose de 5 fascicules. Le prix de chaque volume est de 96 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscript accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . ., des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis par la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent etre laissés au libre usage de chacun.

Pagina

Commentationes

AHLRICHS, R., and W. KUTZELNIGG: *Ab initio* Calculations on Small Hydrides Including Electron Correlation. I. The BeH_2 Molecule in Its Ground State 377

THORHALLSSON, J., C. FISK, and S. FRAGA: Physical Properties of Many-Electron Atomic Systems Evaluated from Analytical Hartree-Fock Functions. VII. Electric Dipole Polarizabilities 388

CADIOLI, B., U. PINCELLI, and G. DEL RE: Hybridization and Correlation in a Model Calculation of a Two-Electron Bond 393

HARTMANN, H., und K. HELFRICH: Quantenmechanische Zweizentren-Coulomb-Modelle für Acetylen, Äthylen und Äthan 406
Quantum Mechanical Two Center Models for Acetylene, Ethylene and Ethane

JORDAN, F., and B. PULLMAN: Extended Hückel Calculations on the Conformation and Structure of Thymine Photodimers 423

BROWN, R. D., B. A. W. COLLER, and J. E. KENT: 1,2,5-, 1,3,4- and 1,2,4-Oxadiazoles. A Theoretical Study of Electric Dipole Moments 435

Relationes

MOFFAT, J. B.: Physical Nature of the Chemical Bond. I. Approach to a Quasi-Optimized LCGTO-MO-SCF Wave Function for the Helium Hydride Ion 447

GUIDOTTI, C., and O. SALVETTI: Double Orbital Exponent SCF Functions for H_2O, NH_3, CH_4 454

HINCHLIFFE, A., and N. TRINAJSTIĆ: Calculation of Proton Coupling Constants for Dibenzothiophene Radical Anion 458

PULLMAN, A., and H. BERTHOD: On the Electronic Structure of the Hydrogen-Bond: Formamide and its Dimers 461

Recensiones

HAMEKA, H. F.: Introduction to Quantum Theory (Ref. K. HENSEN) 465

DAUDEL, R.: Théorie quantique de la réactivité chimique (Ref. H. GEBELEIN) 465

JANSEN, L., and M. BOON: Theory of finite groups (Ref. E.-A. REINSCH) 466

Errata

MALRIEU, J. P., P. CLAVERIE, and S. DINER: Use of Perturbation Methods for the Study of Configuration Interaction Effects. III. The Second Order Corrections to Transition Energies 467

CLARK, D. T.: Self Consistent Field Molecular Orbital Treatment Including Excited States of Cyclopropane, Ethylene Oxide and Ethyleneimine 467

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck: Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

Printed in Germany

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 33, Heidelberger Platz 3